Représentations stéréochimiques

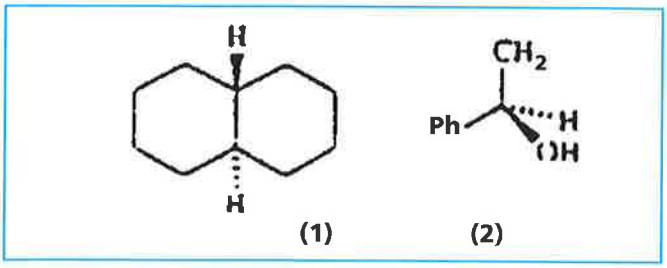
Les diagrammes structuraux qui représentent de la stéréochimie doivent être préparés avec un soin particulier pour s'assurer qu'il n'y a aucune ambiguïté.

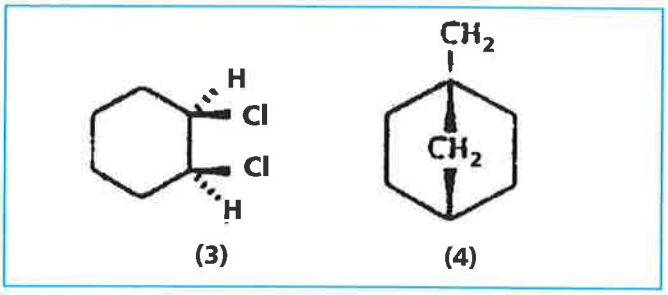
En général, les traits simples représentent des liaisons qui sont approximativement dans le plan du dessin ; les liaisons qui vont vers des atomes se trouvant au-dessus du plan sont représentées par des triangles en trait plein (qui partent d'un atome dans le plan du dessin situé au sommet du triangle) alors que celles qui s'en vont vers un atome situé au-dessous du plan sont représentées par des lignes de traits parallèles rapprochés . On peut aussi utiliser un trait plein à la place du triangle en trait plein et une ligne pointillée à la place des lignes parallèles ; toutefois, il vaut mieux réserver les lignes pointillées pour les liaisons partielles, les délocalisations ou les liaisons hydrogène. L'utilisation de lignes parallèles en coin n'est pas recommandée, parce qu'elle est ambiguë. Elles sont couramment utilisées de deux façons totalement opposées. Divers auteurs les utilisent pour indiquer que le sommet du triangle est soit dans le plan du dessin, soit éloigné de l'observateur. Si la stéréochimie n'est pas connue, on peut l'indiquer explicitement à l'aide d'un trait sinueux . L'utilisation de points ou de cercles ouverts pour indiquer la stéréochimie d'un centre est fortement déconseillée.

D'autres conventions, non présentées ici, comprennent la projection de Fischer, la projection de Newman, la perspective cavalière et la projection en triangles.

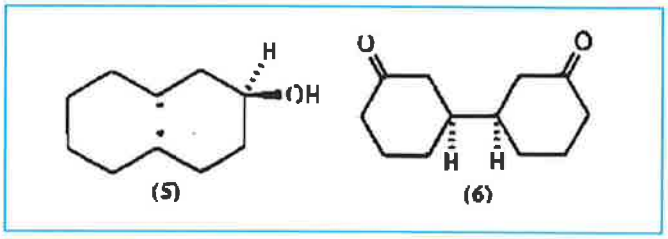
Il n'est pas possible de définir des règles strictes pour représenter une stéréochimie. En général, la représentation est la plus claire lorsque tous les noyaux d'un système cyclique ortho-condensé (ou ses dérivés saturés) sont maintenus dans le plan du dessin et que les substituants en tête de pont sont représentés au-dessus ou au-dessous du plan (1). Avec une structure acyclique (2) ou avec d'autres substituants sur un cycle (3) y compris les ponts (4), on représente les liaisons au-dessus ou au-dessous du plan. On ne doit pas omettre les atomes d'hydrogène attachés à des positions de stéréochimie désignée (3).

Ce texte est extrait du chapitre «Glossaire de la stéréochimie» des *Techniques de l'Ingénieur* (Traité K) devant être publié à la fin de 1995. Ce chapitre est une adaptation française, préparée par R. Panico, J.-C. Richer et J. Rigaudy, de la Recommandation 1994 de l'UICPA «Basic terminology of stereochemistry» (réf. [1]). *L'Actualité Chimique* remercie *Les Techniques de l'Ingénieur* pour leur aimable autorisation.

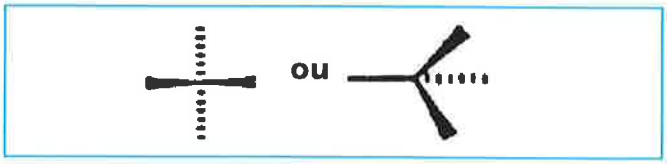




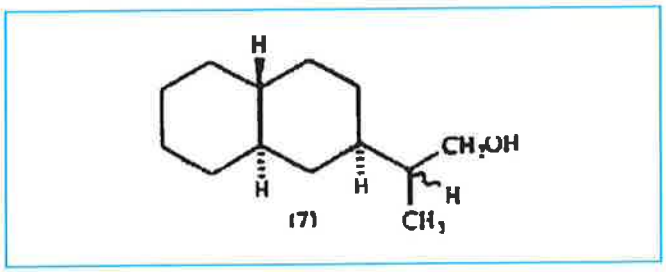
La stéréochimie due aux substituants attachés à un noyau ne doit pas être représentée au niveau d'un angle rentrant (marqués par un astérisque dans (5) ; bien que cela soit approprié pour un carbonyle ou un N-méthyle). Toute liaison entre deux positions de stéréochimies désignées doit rester en trait normal (6).



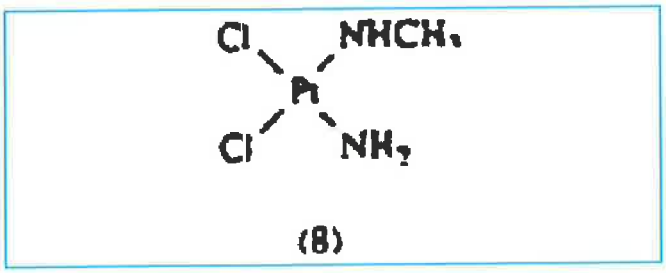
Avec une stéréochimie tétraédrique, les représentations suivantes sont recommandées :

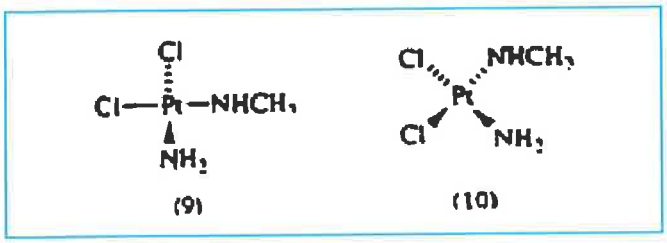


On peut utiliser un trait sinueux pour indiquer soit que la stéréochimie n'est pas connue (7) mais qu'une seule forme est présente soit, si on l'explicite dans le texte, que les deux isomère sont présents et qu'ils seront définis en temps opportun. Si on ne veut pas représenter de stéréochimie, il vaut mieux n'utiliser que des traits normaux pour toutes les liaisons.

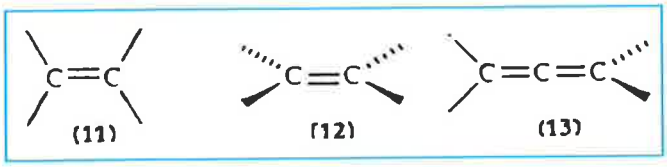


La molécule plan carré (8) peut aussi être représentée sous les formes (9) ou (10).

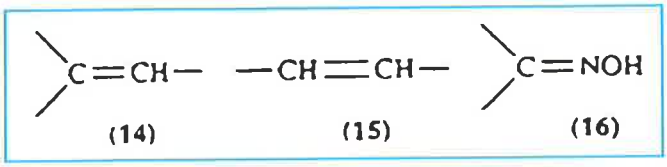




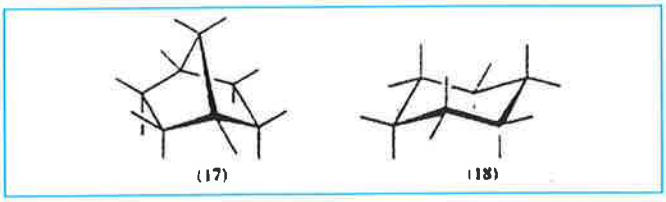
Dans la mesure du possible, si on veut impliquer une stéréochimie, on doit représenter les doubles liaisons avec des angles qui sont aussi près que possible de la réalité (11), (12), (13), c'est-à-dire 120°.

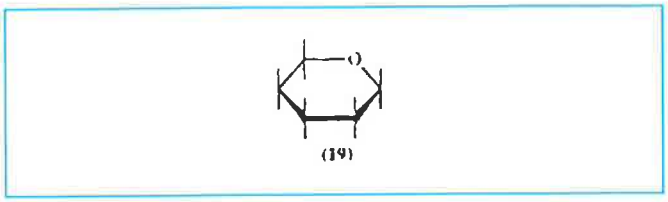


Pour représenter l'absence d'information stéréochimique, on doit utiliser une représentation linéaire (14), (15) et (16).



Dans une représentation en perspective, il est préférable d'indiquer la partie du cycle qui est considérée comme située en avant à l'aide de traits gras ou en triangles (17), (18) et (19) et de «briser» les liaisons qui sont en arrière quand elles coupent une liaison qui passe en avant (17) et (18). Dans ce type de représentation stéréochimique, les liaisons vers les substituants doivent être maintenues normales.





Pour en savoir plus

[1] IUPAC, Commission on Nomenclature of Organic Chemistry, Section E : Stereochemistry (Recommendations 1974), *Pure Appl. Chem.*, **1976**, *45*, p. 11-30. Voir aussi réf. [2] et [3].

[2] IUPAC, Commission on Nomenclature of Organique Chemistry, *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H*, Pergamon Press, **1979**, p. 473-490 ; voir aussi IUPAC, Commission on the Nomenclature of Organic Chemistry, *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry*, Blackwell Scientific Publications, **1993**, p. 149-154 ; *Nomenclature UICPA des composés organique*, Masson, **1994**, p. 160-166.

[3] International Union of Biochemistry and Molecular Biology, *Biochemical Nomenclature and Related Documents*, 2nd edition, Portland Press, **1992**, p. 1-18.